

文章编号: 1007-4627(2023)03-0001-08

基于神经网络模型的原子核基态自旋分布的随机相互作用研究

刘登¹, ALAM Noor A¹, 肖越¹, 雷杨², 覃珍珍¹

(1. 西南科技大学数理学院, 四川绵阳 621010;

2. 西南科技大学国防科技学院, 四川绵阳 621010)

摘要: 利用神经网络模型学习、模拟随机两体系综 (TBRE) 下的原子核基态自旋分布, 并对学习后的模型输入特征进行了分析。这是核物理中利用神经网络模型进行分类的典型应用。研究发现使用本文采用的单隐藏层神经网络模型, 精确地描述每个随机相互作用系综内的样本仍比较困难。但是神经网络模型可以相对较好地描述基态自旋的统计性质。这可能是因为神经网络模型学习到了 TBRE 中基态自旋分布的经验规律。

关键词: 神经网络; 随机两体系综; 原子核基态自旋

中图分类号: O571.53 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.32.01.01

1 引言

原子核是一个典型的复杂多体量子系统。原子核在随机相互作用系综内的规律性鲁棒特征为量子多体问题研究提供了另一种途径。随机相互作用研究可以追溯到随机矩阵的研究^[1]。在这类研究中, 随机数被作为核多体哈密顿量矩阵元。对角化这样的随机矩阵得到的能谱统计性质可以与实验进行对比, 并进一步与量子混沌现象联系起来^[2]。上世纪七十年代, Wong、Bohigas 等^[3-5]将这类使用随机数作为核理论输入的想法引入壳模型 (Shell Model)^[6-7], 即使用随机数的两体相互作用矩阵元作为壳模型输入, 以观察这种虚拟核的能谱统计特征, 以定量方式说明原子核中的量子混沌现象^[5,8-11]。这样的大样本虚拟核数据集就形成了随机两体系综 (two-body random ensemble, TBRE)。

上述工作的持续深入使人们意识到, 原子核的许多能谱统计相关的特征与构成粒子之间的相互作用细节可能并没有必然联系。因此, TBRE 就可以成为探索原子核与相互作用细节无关的内禀特征的适用平台。受上述思想的启发, Johnson 等^[12-13]在 TBRE 中针对原子核低激发态性质进行统计, 获得一系列与核子相互作用无关的原子核低激发态鲁棒特征。这其中最典型的特征是, 在 TBRE 中, 偶偶核的基态自旋为 0 的几率远远大于自旋为 0 的基矢在全空间中所占比重。这就被称为原子核基态零自旋占优现象 (predominance of $I = 0$ ground state)。随后该现象也在玻色子体系中被发现^[14-15]。

实验上, 偶偶核的基态自旋的确均为零。但是通常一般认为这是核力短程性所形成对力驱使核子配对的一种直接体现。然而, 在 TBRE 中, 两体相互作用矩阵元全部是随机的。对力在其中并不占优。原子核基态零自旋占优现象之所以值得注意, 是因为它违反了人们的朴素认知: “零自旋基态源自于核子配对”。在 TBRE 中, 就算相互作用没有对力, 也有很大几率得到零自旋基态。

基态零自旋占优现象的发现是颠覆性的, 但是理解它则极具挑战。因为解释这种现象, 相当于要从数学上计算各种自旋作为基态的概率分布。而核模型是典型的非线性系统, 难以适用统计推断理论。一直以来, 学者们就尝试唯象地使用多种可计算量来理解 TBRE 中原子核基态自旋的分布, 如每个自旋的最低特征值的分布^[14]和分布宽度^[16], 自旋耦合的几何混沌性^[17], 最大和最小的对角线矩阵元^[18], 在 TBRE 玻色子体系尝试给出不同自旋的最低本征值极限表示及与之对应基态几率^[19-21], 不同自旋基态的波函数特征^[22-23], 不同自旋基态的能量尺度特征^[24], 沈佳杰等使用真实的剩余两体相互作用作为随机两体矩阵元分布的中心值, 发现基态零自旋的概率与两体矩阵元分布的中心值具有很大的相关性^[25], 等等。

在上述探索基础上, 一些经验规则被提出以预测基态自旋概率分布, 如, Kusnezov 等使用随机多项式方法^[19]可以先验地给出 sp 玻色子的概率分布, 其结果与 Bijker 等利用平均场方法^[20-21], 通过考虑哈密顿函数的势能面与几何形状之间的关系所得到的结果是一致的; Chau 等讨论了 d 玻色子系统和 $f_{7/2}$ 壳层 4 个费米子的情况, 说明特定自旋基态与原子核特征量所决定的几何形状之前的关联, 进而预测相应自旋基态存在的几率^[26];

收稿日期: 2023-11-07; 修改日期: 2023-11-07

基金项目: 国家自然科学基金青年基金 (12105234)

作者简介: 刘登 (1998-), 男, 四川泸州人, 硕士研究生, 从事原子核结构理论研究; E-mail: 1990404867@qq.com

通信作者: E-mail: leiyang19850228@gmail.com

赵玉民等指出 TBRE 中偶偶核基态零自旋占优现象可能与某些特定两体相互作用矩阵元相关, 进而提出了一套较为普适的经验规则^[27]来预测基态自旋分布。需要指出的是赵玉民规则相当于将基态自旋零占优的决定因素归结为某些具体两体矩阵元, 有利于从微观机制出发解释这一现象, 因此, 这个规则也被应用于全文分析中。

但上述前人工作均受困于核模型的复杂性。为解决这一困境, 可以使用一种可被理解的简单模型来模拟壳模型行为, 以此找到态自旋分布与相互作用之间的具体关联, 从而为最终解释基态零自旋占优现象提供方法学支撑。神经网络模型 (Neural Networks, NN) 可以被看作是这种简单模型的候选方法。它具有强大的学习、预测能力与适应能力^[28], 以应对多种复杂问题, 如语言翻译、语音识别、计算机视觉、自动驾驶乃至一些复杂物理系统。就基态自旋分布问题而言, 可以将 TBRE 样本中的相互作用矩阵元作为 NN 的输入, 基态自旋作为输出, 利用这样的 NN 模型来学习 TBRE 中的壳模型的基态自旋行为, 从而得到一种结构相对比较简单, 可用于分析相互作用与基态自旋之间关联的壳模型近似。TBRE 可以为 NN 学习提供巨量甚至是无限不重复的数据集, 有利于提升 NN 的泛化能力, 使其能够更有效地模拟壳模型基态自旋特征。这也是使用 NN 分析 TBRE 中的原子核鲁棒行为的一大优势。

近年来, 低能核结构研究中已经引入多种神经网络模型^[29], 用来预测原子核的各种性质以辅助分析核实验数据。如, 改进核质量的描述和预言^[30-33]、预测核电荷半径^[34]、研究原子核低激发谱^[35-36]、描述 α 衰变半衰期^[37]、描述 β 衰变寿命^[38-39]、预测核散裂反应中产物截面^[40]、评价核裂变碎片产额分布^[41] 等等。但是这些工作主要关注了神经网络模型的拟合能力。而预测 TBRE 样本的基态自旋^[42] 本质是一种分类问题。将 NN 的分类能力应用于低能核结构研究仍是不多见的。本文的神经网络模型的架构可能为这方面的应用提供参考。

2 模型框架

2.1 随机两体系综

在随机两体系综中, 核系统哈密顿量忽略了单体项、三体及三体以上的剩余相互作用, 仅考虑了两体相互作用。在壳模型框架下, 两体相互作用可以普适地表示为:

$$H_2 = \sum_J \sum_{j_1 j_2} \sum_{j_3 j_4} G_{j_1 j_2 j_3 j_4}^J A_J^\dagger(j_1 j_2) A_J(j_3 j_4) \quad (1)$$

公式 (1) 中 $G_{j_1 j_2 j_3 j_4}^J$ 为两体相互作用矩阵元, $A_J^\dagger(j_1 j_2)$ 是 j_1 、 j_2 轨道上两个粒子耦合成角动量为 J 这样的粒子对所对应的产生算符, $A_J(j_3 j_4)$ 则对应于相应的粒子对湮

灭算符。

在 TBRE 中, 式 (1) 的 $G_{j_1 j_2 j_3 j_4}^J$ 为独立的高斯随机数, 其中心值为 0, 对角元的宽度为 1, 而非对角宽度为 $1/\sqrt{2}$:

$$\rho(G_{j_1 j_2 j_3 j_4}^J) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(G_{j_1 j_2 j_3 j_4}^J)^2}{2\sigma^2}\right\}, \quad (2)$$

其中

$$\sigma^2 = \frac{1}{2} (1 + \delta_{j_1 j_2 j_3 j_4}),$$

以保证相互作用矩阵元的统计分布不随单粒子能级的变换而改变。

2.2 分类神经网络

本文构建的神经网络分类模型包含输入层、一个隐藏层^[43]和输出层, 如图1所示。其中输入层将输入壳模型两体相互作用矩阵元, 输入层神经元个数应等于壳模型两体相互作用矩阵元个数; 输出层则给出在对应相互作用输入下, 不同自旋成为基态的几率, 输出层神经元个数为应为所有可能的基态自旋的个数。根据 Sigmoid^[44]、

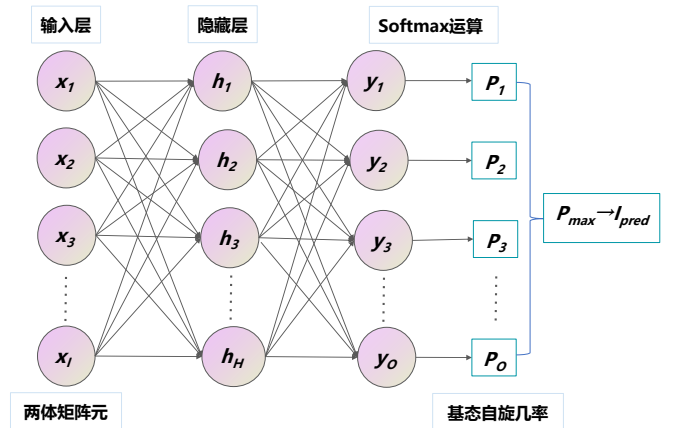


图 1 (在线彩图) 本文神经网络分类模型示意图。

Tanh^[45]、ReLU (Rectified Linear Unit)^[46] 三种不同激活函数的性能对比 (见表2, 及相关正文论述), 我们认为 ReLU 激活函数对本文工作可能是一种相对合理的选择。如无特殊声明, 本文神经网络模型均采用 ReLU 激活函数。设 $\mathbf{x} = \{x_i\}$ 为网络输入, \hat{y} 为网络输出, 则有

$$\hat{y}(\mathbf{x}; \omega) = a + \sum_{j=1}^H b_j \text{ReLU}\left(c_j + \sum_{i=1}^I d_{ji} x_i\right) \quad (3)$$

公式 (3) 中 $\omega = \{a, b_j, c_j, d_{ji}\}$ 表示神经网络模型的参数, H 和 I 分别为神经网络模型隐藏层神经元个数和输入量的个数。

输出层引入 Softmax 函数^[47], 将未规范化的预测数值转换为非负数, 并且总和为 1 的概率值, 同时保持模

型具有可导性质。如下式：

$$P_k = \text{Softmax}(\mathbf{y})_k = \frac{e^{y_k}}{\sum_{l=1}^L e^{y_l}} \quad \text{for } k = 1, \dots, L$$

其中, L 为输入个数。Softmax 运算不会改变未规范化的预测之间的大小次序, 而是通过确定分配给每个类别的概率来表达预测结果。因此, 常将 Softmax 函数应用于分类问题的神经网络模型中。这种方式可以将模型的输出转化为表示各个类别概率的形式, 使得我们可以直接解读并使用这些概率进行分类决策。

给定一个包含 N 个数据的学习集 $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)\}$ 和损失函数, 即可以训练神经网络模型参数 ω 。对于分类问题, 一般选择交叉熵作为损失函数, 即对于任何标签 \mathbf{y} 和模型预测 $\hat{\mathbf{y}}$, 损失函数为:

$$\text{loss}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = - \sum_{m=1}^n y_m \log \hat{y}_m \quad (4)$$

损失函数可以量化神经网络输出 $\hat{\mathbf{y}}$ 与学习数据 \mathbf{y} 之间的偏差, 网络的学习过程就是通过适当的优化算法 (本文使用 Adam (Adaptive Moment Estimation) 优化算法^[48]) 调节网络参数 ω 以减小损失函数 (4), 直至满足要求, 从而得到具有预测能力的神经网络模型。

2.3 网络结构优化

我们在 6 个模型空间中开展了 TBRE 样本生成工作, 包括 4 个价核子在 $f_{7/2}$ 轨道 (简记为 $(f_{7/2})^4$), 4 个价核子在 $h_{11/2}$ 轨道 (简记为 $(h_{11/2})^4$), 2、4、6 个价核子处于 sd 壳 (分别对应于 $^{18}, ^{20}, ^{22}\text{Ne}$), 以及 6 个价核子处于 pf 壳 (对应于 ^{46}Ca)。这 6 个模型空间分别对应着不同的复杂程度的壳模型计算。

在 $(f_{7/2})^4$ 空间中, 壳模型本征值由两体相互作用矩阵元的线性组合确定。线性组合系数被称为 “cfp 系数”^[49]。基态自旋的确定就是在对比哪个角动量所对应本征值最低。另一方面, 无隐藏层的神经网络也对应于输入 (两体相互作用矩阵元) 的线性组合数值对比, 并由 softmax 运算给出各自旋为最低能量的几率。两模型在基态自旋确定方面的计算方式是类似的。若将壳模型本征值中的 cfp 系数作为神经网络模型的权重参数输入模型就可以得到 100% 相同的基态自旋结果。因此在 $(f_{7/2})^4$ 空间中, 即使不引入隐藏层神经网络模型也可以实现 98% 的基态自旋预测准确率。但是神经网络模型训练所得的权重系数与壳模型本征值中的 cfp 系数并不相同, 因此无隐藏层神经网络并不能得到 100% 的准确率。我们尝试引入一层隐藏层来提升神经网络模型的预测准确率, 并观察不同神经元数目对准确率的影响, 结果如图2所示。模型的基态自旋预测准确率在提高神经元数目后有

所提升, 但仍无法达到 100%。由于隐藏层对 $(f_{7/2})^4$ 计算结果影响较小, 本文针对 $(f_{7/2})^4$ 空间的神经网络模型将不引入隐藏层。

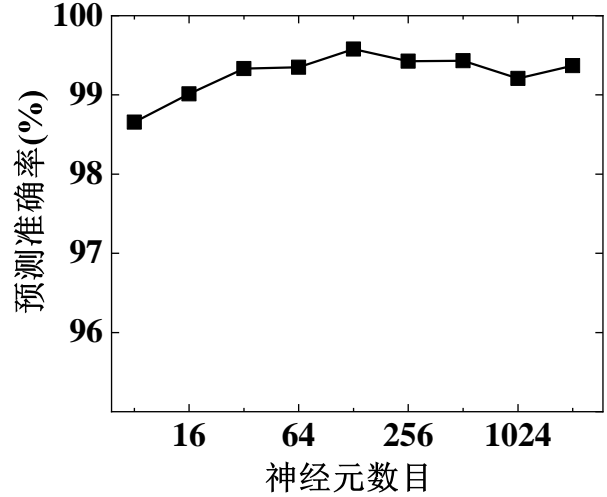


图2 在 $(f_{7/2})^4$ 空间中, 神经网络模型预测准确率随单隐藏层神经元数目的演化。

对于 $(h_{11/2})^4$ 、 ^{18}Ne 空间, 情况相对复杂。有部分本征值必须通过对角化得到。虽然这些对角化过程可能是解析的, 但已无法通过图运算来严格获得权重参数 (或者说 cfp 系数) 对交叉熵的导数。因此有必要在这个神经网络模型中引入隐藏层, 提高模型对非线性对角化的适应能力。而在 $^{20}, ^{22}\text{Ne}$ 与 ^{46}Ca 空间中, 本征值与 cfp 系数的关系已完全非线性化, 隐藏层的引入更为必要。

通过对比单隐藏层中不同神经元数目对预测准确率的影响, 我们确定 64 个神经元可能是单隐藏层神经网络的最优平衡数。图3给出了 N 个神经元和 $2N$ 个神经元的预测准确率之间的差异。基于 64 个神经元, 隐藏层神经元数目的进一步增大并没有显著提升模型预测精度, 反而会大规模地增加计算开销。因此, 在本文单隐藏层神经网络模型中 64 个神经元可能是神经元数目的最优平衡数。除 $(f_{7/2})^4$ 空间外, 我们的单隐藏层神经网络模型所插入的隐藏层神经元个数均设置为 64。

综上所述, 表1列出了不同空间中, TBRE 样本量以及神经网络模型结构。

3 结果与分析

3.1 模型预测准确性

激活函数^[50] 通过非线性变换学习抽象特征, 在神经网络中起着至关重要的作用。常见的激活函数有 Sigmoid、Tanh 和 ReLU 函数, 表2讨论了不同激活函数对我们的神经网络模型预测精度的影响。由表2可知, 对于 6 个模型空间 Tanh 和 ReLU 函数的模型预测精度十分接

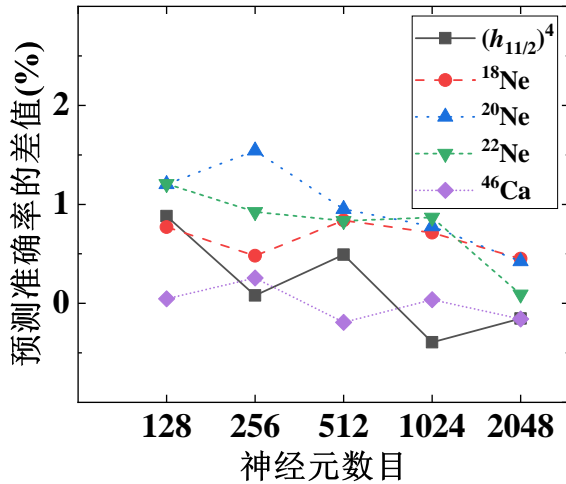


图 3 (在线彩图) 单隐藏层神经网络模型中使用 N 个神经元和 $2N$ 个神经元的预测准确率差异。

表 1 6 个模型空间所对应 TBRE 样本量以及神经网络结构。由于 $(f_{7/2})^4$ 空间的壳模型计算与线性回归神经网络模型在基态自旋确定方面的计算模式是类似的, 都是两体相互作用矩阵元的线性组合, 因此不加入隐藏层。其它 5 个模型空间均加入一个含有 64 个神经元的隐藏层。

模型空间	TBRE 样本量	输入层神经元数 (两体矩阵元数)	输出层神经元数 (基态自旋数)
$(f_{7/2})^4$	130000	4	5
$(h_{11/2})^4$	80000	6	10
^{18}Ne	90000	30	5
^{20}Ne	90000	30	7
^{22}Ne	100000	30	8
^{46}Ca	140000	94	13

近, 优于 Sigmoid。由于 Tanh 激活函数需要计算指数, 较 ReLU 对计算开销的要求更高, 全文神经网络如无特殊声明均采用了 ReLU 激活函数。

表 2 不同激活函数所对应的预测精度 (%)。计算所用神经网络模型均包含一个隐藏层, 64 个神经元。

激活函数	$(f_{7/2})^4$	$(h_{11/2})^4$	^{18}Ne	^{20}Ne	^{22}Ne	^{46}Ca
Sigmoid	99.43	96.94	86.48	69.51	78.69	55.28
Tanh	99.64	97.21	88.77	70.24	80.16	55.84
ReLU	99.79	97.43	88.12	69.90	80.42	55.34

图4提供了 6 个模型空间中, 神经网络对基态自旋预测精度 (%) 与空间维数之间的关联。对于 $(f_{7/2})^4$ 空间, 由于其壳模型本征值本身就是两体矩阵元的线性组合, 与线性回归的神经网络模型在基态自旋确定方面的计算方式是类似的, 因此神经网络模型可以实现高达 98% 的基态自旋预测准确率。而对于 $(h_{11/2})^4$ 空间, 由于部分本征值与两体矩阵元呈非线性关联, 需要在模型中引入了隐

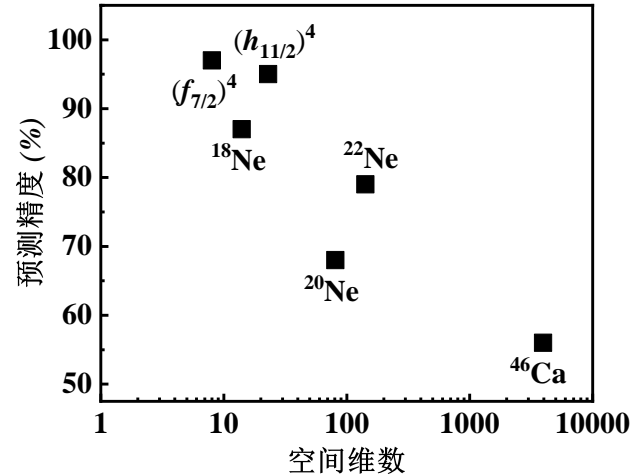


图 4 6 个模型空间中, 神经网络模型对基态自旋预测精度 (%) 与空间维数之间的负相关性。

藏层, 以实现更高的预测准确率。结果显示, 其准确率也能达到 97%, 较令人满意的成果。但是对于其它四个空间, 准确率有大幅下滑: 空间维数越高, 准确率越低。我们计算了模型预测精度 (%) 与空间维数之间 Pearson 相关系数^[51], 结果为 -0.788, 表明两者之间存在一定的负相关性。随着空间维数的增加, 壳层的复杂度增加, 神经网络模型预测基态自旋的准确率会下降。这是一个可以理解的结果, 随着量子系统的复杂度提升, 神经网络模型的泛化能力必然受到挑战。尽管我们穷尽多种手段来提高分类神经网络模型预测精度, 但结果均不甚理想。这说明壳层模型的复杂程度已经超出了本文所使用的神经网络模型适用范围。可能需要更为专门的神经网络结构才能准确地预测 TBRE 中的基态自旋。这也从一个侧面反映出基态零自旋占优现象的复杂性。

为了更加细致地了解神经网络模型对不同自旋的预测的可靠性是否存在差异, 图5给出了 6 个虚拟核的神经网络模型的混淆矩阵。在该混淆矩阵中, 纵轴表示神经网络模型预测的基态自旋 (I_{NN}), 横轴表示壳模型计算得到的基态自旋 (I_{SM}), 其中的灰度深浅代表, 在神经网络预测为基态自旋为 I_{NN} 的验证样本中, 壳模型计算所得基态自旋为 I_{SM} 的几率的大小。可以看到混淆矩阵的主对角线一般呈深色。这说明对于特定基态角动量, 神经网络模型的预测结果在很大程度上与壳模型的结果一致。从统计角度来看, 可以认为神经网络模型至少学习到了壳模型基态自旋特征的某些部分。此外, 根据图4的数据, 我们可以发现, 相较于具有更高维度的 ^{22}Ne , ^{20}Ne 核的基态自旋预测准确率反而较低。这与图5的 ^{20}Ne 吻合的。可以看到 ^{20}Ne 核相较于其他核, 主对角线与其他区域的颜色区分并不十分明显。说明该空间中基态自旋的神经网络预测受到了更多的挑战, 有待进一步挖掘该

空间中特有的多体复杂性特征。

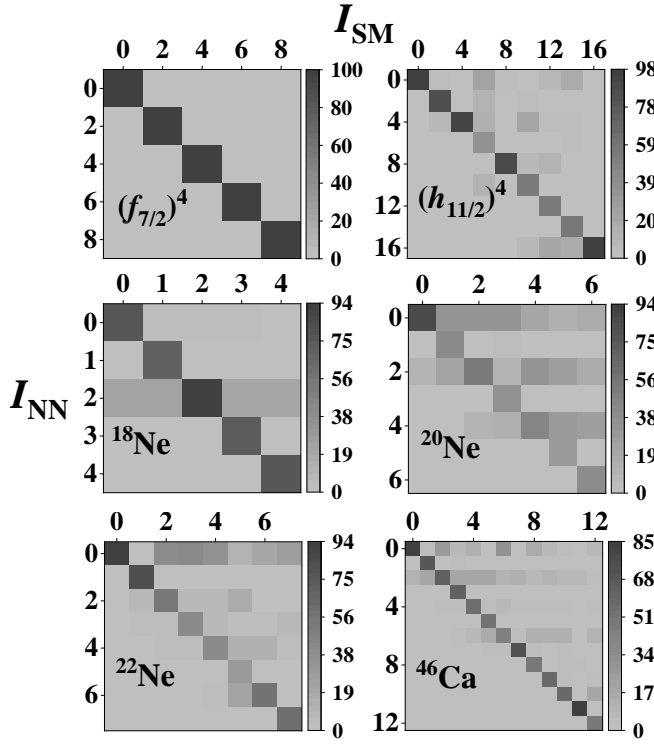


图5 $(f_{7/2})^4$ 、 $(h_{11/2})^4$ 、 ^{18}Ne 、 ^{20}Ne 、 ^{22}Ne 、 ^{46}Ca 6个模型空间中神经网络对基态自旋预测的混淆矩阵。纵轴表示神经网络模型预测的基态自旋 (I_{NN})，横轴表示壳模型计算得到的基态自旋 (I_{SM})，其中的灰度深浅代表，在神经网络预测为基态自旋为 I_{NN} 的验证样本中，壳模型计算所得基态自旋为 I_{SM} 的几率的大小。

为了进一步评估神经网络模型的性能，图6给出了TBRE中，壳模型和神经网络模型所给出的不同自旋 I 作为基态自旋的几率 P_I 。通过对比，我们发现神经网络模型在所有模型空间中，都能够很好地吻合壳模型计算的基态自旋分布，说明神经网络在描述TBRE鲁棒的统计性质方面取得了部分成功。

3.2 经验规则的习得

为简单预测TBRE中原子核基态自旋的分布，赵玉民等提出了一种通用的经验规则^[18]。他们的思路是将众多两体矩阵元中的其中一个矩阵元设为-1，其余设为0，然后将这种相互作用输入到壳模型中进行计算，记录基态自旋 I 。如果模型空间中有 N 个独立的两体矩阵元，那么就将上述过程会重复 N 次，每次设定不同的矩阵元为-1。最后统计自旋 I 在 N 次数值实验中是基态自旋的次数，记为 N_I 。那么自旋 I 的作为基态自旋的几率可估为

$$P_I = N_I / N \quad (5)$$

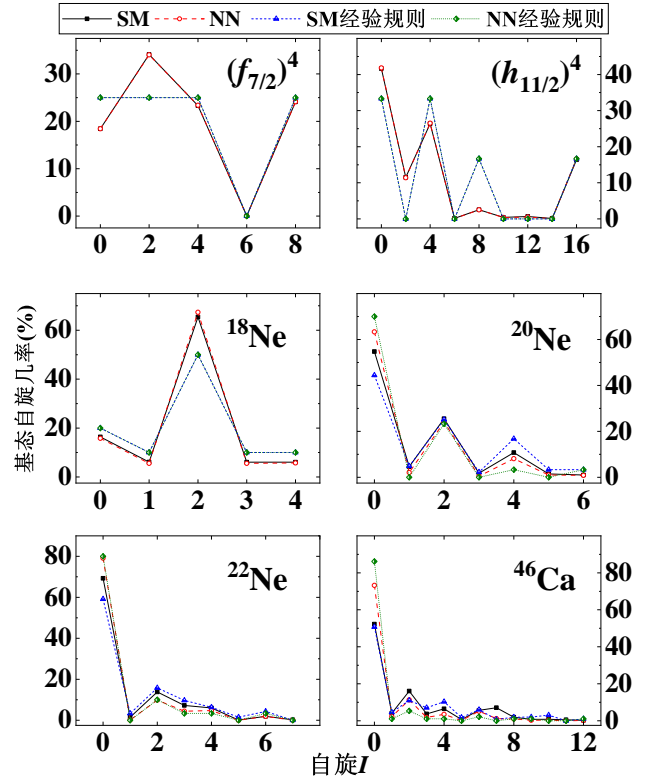


图6 (在线彩图) TBRE中，对于 $(f_{7/2})^4$ 、 $(h_{11/2})^4$ 、 ^{18}Ne 、 ^{20}Ne 、 ^{22}Ne 、 ^{46}Ca 6个模型空间，壳模型及神经网络模型所给出的不同自旋 I 作为基态自旋的几率 P_I ，以及相应的经验规则预测结果。黑色方块表示壳模型计算的基态自旋分布，红色圆圈表示神经网络模型预测的基态自旋分布，蓝色三角形使用壳模型利用经验规则给出的基态自旋分布，橄榄色菱形表示神经网络模型利用经验规则结出的基态自旋分布。

赵规则的核心思路就是将“特定自旋 I 作为基态自旋”归因于某一个或一些两体矩阵元。将其中一项矩阵元设为-1，对应于该矩阵元很小时的一种极限情况。那么在随机两体系综内，由于该矩阵元较小而产生的自旋为 I 的基态在某种程度上就是可以理解的。如果为自旋 $I=0$ 负责的矩阵元相对较多，那么零自旋基态出现的几率也就更多，经验上就可以解释基态零自旋占优现象。在表3给出了在 $(f_{7/2})^4$ 和 $(h_{11/2})^4$ 两个较简单的模型空间中，壳模型中两体矩阵元 G^J 与基态自旋 I 基于赵规则的关联。比如说，在 $(h_{11/2})^4$ 空间中， G^0 或 G^4 很小时，都可以得到自旋为 $0\hbar$ 的基态，而自旋为 $8\hbar$ 的基态只能产生于 G^8 很小的情况。自然地，基态自旋为 $0\hbar$ 的几率就将大于自旋为 $8\hbar$ 的几率。

另一方面，训练后的神经网络模型也同样适用于赵规则：可以将神经网络模型的输入之一设为-1，其余设为0，记录模型预测的基态自旋 I 。反复 N 次实验，也将

得到基于赵规则的神经网络模型的两体矩阵元与基态自旋 I 之间的关联 (如表3所示), 以及相应的 P_I 分布预测 (如图6所示)。在表3中, 对比了壳模型与神经网络模型基于赵规则所得两体矩阵元- I 关联。两者结果完全一致, 这表明我们的神经网络模型已在数据中学习到了基于赵规则的两体矩阵元- I 关联, 可复现壳模型中的经验规则, 也就可以复现赵规则所预测的基态自旋分布。¹

表 3 $(f_{7/2})^4$ 和 $(h_{11/2})^4$ 空间中, 壳模型与神经网络模型基于赵规则所得两体矩阵元 G^J 与自旋 I 之间的关联。此处 G^J 代表两体相互作用矩阵元 $G^J_{jj,jj}$ (见式 (1)), 表中数字代表对应当 $G^J = -1$, 而其它矩阵元为 0 时, 两模型得到的或预测的基态自旋 $I_{g.s.}$ 。

空间	模型	G^0	G^2	G^4	G^6	G^8	G^{10}
$(f_{7/2})^4$	壳模型	0	4	2	8		
	神经网络	0	4	2	8		
$(h_{11/2})^4$	壳模型	0	4	0	4	8	16
	神经网络	0	4	0	4	8	16

我们也在图6描绘了基于两种模型的经验规则所给出的基态自旋分布 P_I 。可以看到, 两种模型的经验规则在所有空间中给出了非常一致的 P_I 分布。但是通过与数值实验进行对比, 针对 $(f_{7/2})^4$ 空间, 两种模型的经验规则高估了 $(f_{7/2})^4$ 空间中的 P_0 , 低估了其中的 P_2 ; 对于 $(h_{11/2})^4$ 空间, 两种模型的经验规则高估了自旋 P_4 、 P_8 , 低估了自旋 P_0 、 P_2 ; 此外 ^{18}Ne 的 P_2 也被一致高估。但是无论基于哪种模型, 经验规则与数值实验所得 P_I 的大致趋势并没有大的偏离, 基态零自旋占优现象也得到合理复现, 说明了经验规则的普适性。

4 结论

本论文旨在利用神经网络模型研究随机两体相互作用系综下原子核的基态自旋分布。尝试使用 Softmax 分类神经网络模型, 在 TBRE 中, 模拟壳模型所隐含的相互作用矩阵元与基态自旋之前的关联, 预测基态概率分布, 从模型预测精度与经验规则两个方面, 验证了该模型的可靠性。

需要注意的是, 此前核物理中神经网络模型的应用更多的是借助其强大的拟合能力, 而分析 TBRE 中的基态自旋分布是神经网络分类能力的具体应用, 在当前核物理研究中是不多见的。另一方面, TBRE 可为神经网络训练提供巨量数据集, 使神经网络模型天然地适用于 TBRE 中的原子核鲁棒性分析。

研究发现, 量子多体系统问题仍然相当复杂, 使用

本文的单隐藏层神经网络模型来精确地描述它仍比较困难。未来期望有更专门的神经网络结构能够用于精确分析原子核基态自旋的确定性因素。但是神经网络模型能够合理地描述原子核基态自旋相关的一些整体统计性质, 如基态自旋分布、混淆矩阵的对角主导特征。这可能是因为神经网络模型有能力习得、重现原子核基态自旋的简单经验规则, 进而从统计上弥补对个体样本理解的偏差。因此, 神经网络模型在描述量子多体系统的统计性质与鲁棒性质方面可能具有一定的潜力, 进一步研究和发展更专门的神经网络结构来模拟复杂的量子多体系统值得关注。

参考文献

- [1] WEIDENMÜLLER H A, MITCHELL G E. Rev Mod Phys, 2009, 81: 539. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.539>.
- [2] BOHIGAS O, GIANNONI M J, SCHMIT C. Phys Rev Lett, 1984, 52: 1. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.52.1>.
- [3] WONG S, FRENCH J B. Nuclear Physics A, 1972, 198(1): 188.
- [4] BOHIGAS O, FX J F. Phys Lett B, 1971, 34(4): 261.
- [5] FRENCH J B, WONG S. Phys Lett B, 2001, 33(7): 449.
- [6] MAYER, MARIA G. Phys Rev, 1948, 74(3): 235.
- [7] HAXEL O, JENSEN H, SUESS H E. Physical Review, 1949, 75(11): 1766.
- [8] ZELEVINSKY V, BROWN B A, FRAZIER N, et al. Physics Reports, 1996, 276(2-3): 85.
- [9] GUHR T, MÜLLER-GROELING A, WEIDENMÜLLER H. Physics Reports, 1998, 299: 198.
- [10] KOTA V. Physics Reports, 2001, 347(3): 223.
- [11] ZELEVINSKY V, VOLYA A. Physics Reports, 2004, 391(3): 311.
- [12] JOHNSON C W, BERTSCH G F, DEAN D J. Phys Rev Lett, 1998, 80(13): 1766.
- [13] JOHNSON C W, BERTSCH G F, DEAN D J, et al. Generalized seniority from random hamiltonians[M]. arXiv, 1999: 279-305.
- [14] BIJKER R, FRANK A. Phys Rev Lett, 2000, 84(3): 420.
- [15] KUSNEZOV D, ZAMFIR N V, CASTEN R F. Phys Rev Lett, 2000, 85(7): 1396.
- [16] BIJKER R, FRANK A, PITTEL S. Phys Rev C, 1999, 60(2): 1766.
- [17] MULHALL D, VOLYA A, ZELEVINSKY V. Phys Rev Lett, 2000, 85(19): 4016.
- [18] ZHAO Y, ARIMA A. Physical Review, C Nuclear Physics, 2001(4): 64.
- [19] KUSNEZOV, DIMITRI. Phys Rev Lett, 2000, 85(18): 3773.
- [20] BIJKER R, FRANK A. Phys Rev C, 2001, 64(6): 656.
- [21] BIJKER R, FRANK A. Physical Review, C Nuclear Physics, 2002 (4): 65.
- [22] KAPLAN L, PAPENBROCK T, JOHNSON C W. Phys Rev C, 2000, 63(1): 014307.
- [23] KAPLAN L, PAPENBROCK T. Phys Rev Lett, 2000, 84(20): 4553.
- [24] DROZDZ S, WOJCIK M. Physica A Statistal Mechanics & Its Applications, 2001, 301(1): 291.
- [25] SHEN Jiajie. Nuclear Physics Review. 2020, 37(3): 7. (in Chinese) (沈佳杰. 原子核物理评论, 2020, 37(3): 7.)
- [26] CHAU HUU-TAI P, FRANK A, SMIRNOVA N A, et al. Phys Rev

¹由于篇幅所限, 其它 4 个较复杂的模型空间的两体矩阵元- I 关联列入了补充材料。

- C, 2002, 66: 061302. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.66.061302>.
- [27] YOSHINAGA N. PHYSICS REPORTS, 2004.
- [28] GAZULA S, CLARK J W, BOHR H. Nuclear Physics A, 1992, 540 (1-2): 1.
- [29] HE W, LI Q, MA Y, et al. Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 2023, 66(8): 282001.
- [30] UTAMA R, PIEKAREWICZ J, PROSPER H B. Phys Rev C, 2016.
- [31] NIU Z, LIANG H. Phys Lett B, 2018, 778: 48. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269318300091>. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2018.01.002>.
- [32] Tian D C, Chen S W, Niu Z M. Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252007. (in Chinese)
(田大川, 陈寿万, 牛中明. 中国科学: 物理学、力学、天文学, 2022, 52(5): 10.)
- [33] Zhao T L, Zhang H F. Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252008. (in Chinese)
(赵天亮, 张鸿飞. 中国科学: 物理学、力学、天文学, 2022, 52(5): 9.)
- [34] UTAMA R, CHEN W C, PIEKAREWICZ J. Journal of Physics G Nuclear & Particle Physics, 2016, 43(11): 114002.
- [35] Yifu WANG, Zhongming NIU. Nuclear Physics Review, 2022, 39(3): 273-280. (in Chinese)
(王逸夫, 牛中明. 原子核物理评论, 2022, 39(273-280).)
- [36] WANG Y, ZHANG X, NIU Z, et al. Phys Lett B, 2022, 830: 137154. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037026932200288X>. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2022.137154>.
- [37] Bu X D, Wu D, Bai C L. Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252005. (in Chinese)
(卜炫德, 吴迪, 白春林. 中国科学: 物理学、力学、天文学, 2022, 52(5): 6.)
- [38] Li P, Bai J H, Niu Z M, et al. Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252006. (in Chinese)
(李鹏, 白景虎, 牛中明, 等. 中国科学: 物理学、力学、天文学, 2022, 52(5): 7.)
- [39] NIU Z, NIU Y, LIANG H, et al. Phys Lett B, 2019.
- [40] Peng D, Wei H L, Pu J, et al. Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252012. (in Chinese)
(彭丹, 魏慧玲, 普洁, 等. 中国科学: 物理学、力学、天文学, 2022, 52(5): 8.)
- [41] Yi J Y, Qiao C Y, Pei J C, et al. Sci Sin-Phys Mech Astron, 2022, 52: 252013. (in Chinese)
(易佳怡, 乔春源, 裴俊琛, 等. 中国科学: 物理学、力学、天文学, 2022, 52(5): 7.)
- [42] Wen Hu-Feng, Shang Tian-Shuai, Li Jian, Niu Zhong-Ming, Yang Dong, Xue Yong-He, Li Xiang, Huang Xiao-Long Acta Phys. Sin., 2023, 72(15): 152101. (in Chinese)
(温湖峰, 尚天帅, 李剑, 等. 物理学报, 2023, 72(15): 152101.)
- [43] LECUN Y, BENGIO Y, HINTON G. nature, 2015, 521(7553): 436.
- [44] MOUNT J. The equivalence of logistic regression and maximum entropy models[Z]. 2011.
- [45] GLOROT X, BORDES A, BENGIO Y. Deep sparse rectifier neural networks[C/OL]//International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. 2011. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:2239473>.
- [46] GLOROT X, BORDES A, BENGIO Y. Journal of Machine Learning Research, 2011, 15: 315.
- [47] WILLIAMS C K I, BARBER D. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 1999, 20(12): 1342.
- [48] KINGMA D P, BA J. Adam: A method for stochastic optimization [C/OL]//BENGIO Y, LECUN Y. 3rd International Conference on Learning Representations, ICLR 2015, San Diego, CA, USA, May 7-9, 2015, Conference Track Proceedings. 2015. <http://arxiv.org/abs/1412.6980>.
- [49] LAWSON R D. Theory of the nuclear shell model[M/OL]. 1980. <https://www.osti.gov/biblio/6688143>.
- [50] DUBEY S R, SINGH S K, CHAUDHURI B B. Neurocomputing, 2022, 503: 92. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925231222008426>. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.neucom.2022.06.111>.
- [51] SEDGWICK P. BMJ, 2012, 345. <https://www.bmj.com/content/345/bmj.e4483>. DOI: 10.1136/bmj.e4483.

Random interaction study on angular-momentum distribution of nuclear ground state with neural networks

LIU Deng¹, ALAM Noor A¹, XIAO Yue¹, LEI Yang², QIN Zhenzhen¹

(1. School of Mathematics and Physics, Southwest University of Science And Technology, Mianyang, 621010, Sichuan;

2. School of Defense and Technology, Southwest University of Science And Technology, Mianyang, 621010, Sichuan)

Abstract: The neural network model is employed to learn and simulate the ground state spin distribution of the nucleus within a stochastic two-system ensemble (TBRE), while analyzing the input characteristics of the learned model. This represents a typical application of NN models for classification in nuclear physics. It's still challenging to use the neural network with only a single hidden layer to accurately describe each sample in the TBRE. However, the neural network model effectively captures the statistical properties of the ground state spin, potentially due to its ability to learn empirical rule governing spin distributions in TBRE.

Key words: neural network; two-body random ensemble; angular-momentum distribution of nuclear ground state

Received date: 07 Nov. 2023; **Revised date:** 07 Nov. 2023

Foundation item: National Natural Science Foundation of China Youth Fund (12105234).

Corresponding author: LEI Yang, E-mail: leiyang19850228@gmail.com